Облікова картка дисертації

I. Загальні відомості

Державний обліковий номер: 0824U000161

Особливі позначки: відкрита

Дата реєстрації: 05-01-2024

Статус: Захищена

Реквізити наказу МОН / наказу закладу:

II. Відомості про здобувача

Власне Прізвище Ім'я По-батькові:

1. Копча Марія Іванівна
2. Kopcha Mariia I.

Кваліфікація:

Ідентифікатор ORCID ID: Не застосовується

Вид дисертації: доктор філософії

Аспірантура/Докторантура: так

Шифр наукової спеціальності: 104

Назва наукової спеціальності: Фізика та астрономія

Галузь / галузі знань: природничі науки

Освітньо-наукова програма зі спеціальності: 48232 Освітньо-наукова програма третього рівня вищої освіти Інституту фізики конденсованих систем НАН України (104 Фізика та астрономія)

Дата захисту: 26-02-2024

Спеціальність за освітою: прикладна фізика

Місце роботи здобувача: Інститут фізики конденсованих систем Національної академії наук України

Код за ЄДРПОУ: 05540014

Місцезнаходження: вул. Свєнціцького, буд. 1, Львів, 79011, Україна

Форма власності: Державна

Сфера управління: Національна академія наук України

Ідентифікатор ROR:

III. Відомості про організацію, де відбувся захист

Шифр спеціалізованої вченої ради (разової спеціалізованої вченої ради): ДФ 35.156.007 ID 4671

Повне найменування юридичної особи: Інститут фізики конденсованих систем Національної академії наук України

Код за ЄДРПОУ: 05540014

Місцезнаходження: вул. Свєнціцького, буд. 1, Львів, 79011, Україна

Форма власності: Державна

Сфера управління: Національна академія наук України

Ідентифікатор ROR:

IV. Відомості про підприємство, установу, організацію, в якій було виконано дисертацію

Повне найменування юридичної особи: Інститут фізики конденсованих систем Національної академії наук України

Код за ЄДРПОУ: 05540014

Місцезнаходження: вул. Свєнціцького, буд. 1, Львів, 79011, Україна

Форма власності: Державна

Сфера управління: Національна академія наук України

Ідентифікатор ROR:

V. Відомості про дисертацію

Мова дисертації: Українська

Коди тематичних рубрик: 29.03.77, 27.35.21, 29.17

Тема дисертації:

1. Особливості колективних збуджень у бінарних рідинах
2. Features of collective excitations in binary liquids

Реферат:

1. Дисертаційна робота присвячена дослідженню колективних збуджень у бінарних рідинах за допомогою комбінації комп'ютерного моделювання методом ab initio молекулярної динаміки та теоретичного аналізу на основі узагальненої гідродинаміки. Об'єктами дослідження є іонний розплав NaCl, оксидний розплав Al2O3 та модельна бінарна рідина Коба-Андерсена, яка є стандартною моделлю для вивчення склоформуючих бінарних рідин. Ідея теоретичного аналізу полягає в знаходженні власних динамічних мод узагальненого рівняння Ланжевена, які відтворюють часові кореляційні функції, отримані в моделюванні ab initio молекулярною динамікою. Для цієї теоретичної методики необхідно побудувати узагальнену гідродинамічну матрицю та знайти її власні моди та власні вектори. Однак, у ab initio молекулярній динаміці (AIMД) виникають принципові проблеми у розрахунках просторових Фур'є-компонент густини енергії в рамках

функціоналу електронної густини. Тому, в роботі запропоновано використовувати ефективну схему відтворення часових кореляційних функцій в рамках термов'язкопружної моделі, коли матричні елементи, пов'язані з флуктуаціями густини енергії є параметрами, які визначаються з найкращого відтворення теоретичними функціями шести парціальних часових кореляційних функцій, отриманих з АІМД. При цьому запропонований підхід, дозволяє задовільнити точні правила сум з точністю до четвертих частотних моментів парціальних динамічних структурних факторів. Параметри підпасування додатково задовільняють нерівності Коші-Шварца, оскільки вони є кореляційними функціями, що є додатковою перевагою даного методу. На практиці, використання запропонованого підходу на основі восьми-змінної термо-в'язкопружної моделі виявилось ефективним для відтворення часових кореляційних функцій, що підтверджує правильність теоретичного підходу. Перевірено якість відтворення парціальних часових кореляційних функцій потік-потік та густина-густина для розплаву оксиду Al2O3 та іонного розплаву NaCl і отримано дисперсії колективних збуджень, використовуючи розроблену методику. Аналіз особливостей дисперсії акустичних та оптичних колективних збуджень проведено для розплаву оксиду Al2O3 та іонного розплаву NaCl. Проведено порівняння з дисперсією колективних збуджень, отриманих з шести-змінного в'язкопружного наближення. Показано, що в'язкопружна модель не здатна правильно відтворити поведінку часових кореляційних функцій та дисперсію колективних мод. Однак, в рамках запропонованої восьми-змінної методики було отримано додаткову вітку пропагаторних збуджень в довгохвильовій області, що дозволило дуже добре відтворити часові кореляційні функції, отримані з АІМД. Дисперсію і загасання трьох гілок власних пропагаторних мод, порівняно з числовими оцінками з положень максимумів відповідних спектральних функцій потоку для того, щоб зрозуміти роль повздовжних акустичних (LA), поздовжніх і поперечних (LO і TO) оптичних збуджень у колективній динаміці бінарних розплавів. Для іонних розплавів NaCl та Al2O3 встановлено, що додаткова вітка власних динамічних мод з восьми-змінної моделі добре співпадає з частотами TO збуджень. Це свідчить про ефекти зачеплення повздовжньої та поперечної динаміки в довгохвильовій області для іонних розплавів, механізм якого на даний час вимагає побудови нових теоретичних моделей з не-локальною (з різними хвильовими числами) взаємодією мод Досліджено поперечні колективні збудження в моделі бінарної рідини Коба-Андерсена для різних співвідношень мас компонент R за фіксованої густини рідини. Встановлено зростання частоти поперечних оптичних мод та збільшення щілини для зсувних хвиль з ростом R. Порівняння результатів комп'ютерного моделювання з теоретичним виразом для щілини зсувних хвиль в простих рідинах показало не застосовність теорії простих рідин для опису щілини зсувних хвиль в бінарних рідинах через наявність крос-кореляцій між флуктуаціями повного масового і мас-концентраційних потоків. Запропоновано та розв'язано аналітично в довгохвильовій області 4-змінну динамічна модель для поперечної динаміки бінарної рідини з явним врахуванням таких крос-кореляцій. Отримано рівняння для щілини зсувних хвиль у бінарних рідинах яка дозволяє пояснити зростання та зникнення щілини зсувних хвиль з ростом R.

2. The thesis is devoted to the study of collective excitations in binary liquids using a combination of ab initio molecular dynamics (AIMD) computer simulations and theoretical analysis based on generalised hydrodynamics. The objects of study are the ionic melt NaCl, the oxide melt Al2O3, and the Kob-Andersen model binary fluid, which is a standard model for studying glass-forming binary fluids. The idea of the theoretical analysis is to estimate eigenmodes of the generalized Langevin equation, which recover the time correlation functions obtained from ab initio molecular dynamics simulation. In this theoretical methodology, one needs to construct a generalised hydrodynamic matrix and find its eigenmodes and eigenvectors. However, in ab initio molecular dynamics, an essential problem arises in calculating the spatial Fourier components energy density within the framework of the density functional theory. Therefore, in this work, we propose to use an efficient scheme for recovering the time correlation functions within the framework of the thermo-viscoelastic model, when the matrix elements associated with the energy density fluctuations are parameters determined from the best fit of the theoretical functions to six partial time correlation functions obtained from AIMD. In this case, the proposed approach allows to satisfy the exact sum rules within the accuracy of the fourth frequency moment of partial dynamic structural factors. The fitting parameters additionally satisfy the Cauchy-Schwarz inequalities, since they

are correlation functions, that is another advantage of this methodology. In practice, the application of the proposed approach based on the eight-variable thermo-viscoelastic model proved to be effective for recovering the time correlation functions, that confirms the validity of the theoretical approach. The quality of recovering the partial current-current and density-density time correlation functions for Al2O3 oxide melt and NaCl ionic melt was proven and the dispersions of collective excitations were obtained using the developed methodology. An analysis of features of the dispersion of acoustic and optic-like collective excitations was carried out for Al2O3 oxide melt and NaCl ionic melt. A comparison with the dispersion of collective excitations obtained from the six-variable viscoelastic approximation was made. It is shown that the viscoelastic model is not able to correctly recover the behavior of the time correlation functions and the dispersion of collective modes. However, within the framework of the proposed eight-variable methodology, an additional branch of propagator excitations in the long-wave region was obtained, which allowed us to recover the time correlation functions obtained from AIMD very well. The dispersion and attenuation of the three propagator eigenmodes branches are compared with numerical estimates from the peak positions of the corresponding current spectral functions in order to rationalize the role of longitudinal acoustic (LA), longitudinal and transverse (LO and TO) optic-like excitations in the collective dynamics of binary melts. For ionic melts NaCl and Al2O3, it is found that an additional branch of eigenmodes obtained from the eight-variable model coincides well with the TO excitation frequencies. This indicates a possible coupling of longitudinal and transverse dynamics in the long-wavelength region for ionic melts, the mechanism of which currently requires a construction of new theoretical models with non-local (with different wavenumbers) mode coupling. Transverse collective excitations in a Kob-Andersen model binary fluid are investigated for different mass ratios R at a fixed fluid density. An increase in frequency of transverse optic-like modes and an increase of the propagation gap for shear waves with R are found. A comparison of the computer simulation results with the theoretical expression for the propagation gap for shear waves in simple fluids shows that the theory of pure fluids is not applicable to describe the propagation gap for shear waves in binary fluids due to the existence of cross-correlations between the fluctuations of the total mass and mass-concentration currents. A 4-variable dynamical model for the transverse dynamics of binary fluids is proposed and solved analytically in the long-wave region with an explicit consideration of such cross-correlations. The equation for the propagation gap for shear waves in binary fluids is obtained, which allows to explain the increase and disappearance of the shear wave gap with the R.

Державний реєстраційний номер ДіР:

Пріоритетний напрям розвитку науки і техніки: Фундаментальні наукові дослідження з найбільш важливих проблем розвитку науково-технічного, соціально-економічного, суспільно-політичного, людського потенціалу для забезпечення конкурентоспроможності України у світі та сталого розвитку суспільства і держави

Стратегічний пріоритетний напрям інноваційної діяльності: Не застосовується

Підсумки дослідження: Теоретичне узагальнення і вирішення важливої наукової проблеми

Публікації:

- T. Bryk, M. Kopcha, G. Ruocco, Ab initio study of collective eigenmodes in dynamics of molten salts, Journal of Molecular Liquids, 2023, Volume 387, 122622. https://doi.org/10.1016/j.molliq.2023.122622
- M. Kopcha, T. Bryk, J.-F. Wax, N. Jakse, Collective dynamics in liquid aluminium oxide: Ab initio analysis of collective eigenmodes, Physical Review B, 2023, Volume 108, 224204. https://doi.org/10.1103/PhysRevB.108.224204

Наукова (науково-технічна) продукція:

Соціально-економічна спрямованість:

Охоронні документи на ОПІВ:

Впровадження результатів дисертації: Впроваджено

Зв'язок з науковими темами:

VI. Відомості про наукового керівника/керівників (консультанта)

Власне Прізвище Ім'я По-батькові:

1. Брик Тарас Михайлович
2. Taras Bryk

Кваліфікація: д. ф.-м. н., професор, 01.04.02

Ідентифікатор ORCID ID: 0000-0002-4360-0634

Додаткова інформація:

Повне найменування юридичної особи: Інститут фізики конденсованих систем Національної академії наук України

Код за ЄДРПОУ: 05540014

Місцезнаходження: вул. Свєнціцького, буд. 1, Львів, 79011, Україна

Форма власності: Державна

Сфера управління: Національна академія наук України

Ідентифікатор ROR:

VII. Відомості про офіційних опонентів та рецензентів

Офіційні опоненти

Власне Прізвище Ім'я По-батькові:

1. Слюсаренко Юрій Вікторович
2. Yurii Slyusarenko

Кваліфікація: д. ф.-м. н., професор, академік НАН України, 01.04.02

Ідентифікатор ORCID ID: 0000-0001-5298-0731

Додаткова інформація:

Повне найменування юридичної особи: Національний науковий центр "Харківський фізико-технічний інститут" Національної академії наук України

Код за ЄДРПОУ: 14312223

Місцезнаходження: вул. Академічна, буд. 1, Харків, Харківський р-н., 61108, Україна

Форма власності: Державна

Сфера управління: Національна академія наук України

Ідентифікатор ROR:

Власне Прізвище Ім'я По-батькові:

1. Штаблавий Ігор Іванович

2. Ihor Shtablavyi

Кваліфікація: д. ф.-м. н., доцент, 01.04.02

Ідентифікатор ORCID ID: 0000-0001-8027-9221

Додаткова інформація:

Повне найменування юридичної особи: Львівський національний університет імені Івана Франка

Код за ЄДРПОУ: 02070987

Місцезнаходження: вул. Університетська, буд. 1, Львів, 79000, Україна

Форма власності: Державна

Сфера управління: Міністерство освіти і науки України

Ідентифікатор ROR:

Рецензенти

Власне Прізвище Ім'я По-батькові:

1. Токарчук Михайло Васильович

2. Mykhailo Tokarchuk

Кваліфікація: д.ф.-м.н., професор, 01.04.02

Ідентифікатор ORCID ID: 0000-0002-9205-1790

Додаткова інформація:

Повне найменування юридичної особи: Інститут фізики конденсованих систем Національної академії наук України

Код за ЄДРПОУ: 05540014

Місцезнаходження: вул. Свєнціцького, буд. 1, Львів, 79011, Україна

Форма власності: Державна

Сфера управління: Національна академія наук України

Ідентифікатор ROR:

Власне Прізвище Ім'я По-батькові:

1. Щур Ярослав Йосифович

2. Yaroslav J. Shchur

Кваліфікація: д. ф.-м. н., старший науковий співробітник, 01.04.02

Ідентифікатор ORCID ID: 0000-0001-9662-6304

Додаткова інформація:

Повне найменування юридичної особи: Інститут фізики конденсованих систем Національної академії наук України

Код за ЄДРПОУ: 05540014

Місцезнаходження: вул. Свєнціцького, буд. 1, Львів, 79011, Україна

Форма власності: Державна

Сфера управління: Національна академія наук України

Ідентифікатор ROR:

VIII. Заключні відомості

Власне Прізвище Ім'я По-батькові голови ради	Пацаган Тарас Миколайович
Власне Прізвище Ім'я По-батькові головуючого на засіданні	Пацаган Тарас Миколайович
Відповідальний за підготовку облікових документів	Копча Марія
Реєстратор	УкрІНТЕІ
Керівник відділу УкрІНТЕІ, що є відповідальним за реєстрацію наукової діяльності	Юрченко Тетяна Анатоліївна